

DEDUCCION DE LAS CONDICIONES DE CONTORNO Y RESOLUCION NUMERICA DE LA ECUACION DE DIFUSION EN AGREGADOS DE BACTERIAS. COMPARACION DE RESULTADOS.

Xavier Flotats i Ripoll

Departament de Matemàtica Aplicada III, E.T.S.E.A.L.

Universitat Politècnica de Catalunya

Abstract.

Bacterial aggregation is usual in several biotechnology processes. The tendency to aggregation modifies bacterial activity due to internal transport limitations. The equation of nutrients transport and consumption in the aggregate, at steady state, is:

$$D_x \nabla^2 C_x - \frac{\hat{\mu}}{Y} X \frac{C_x}{K_s + C_x} = 0$$

The efficiency on nutrients consumption depends on aggregation geometry and external transport limitations.

In this paper solutions for spherical and cylindrical geometry, and a methodology to determine a boundary condition that incorporates parameters defining external transport phenomena are presented.

1.-Introducción.

En procesos químicos de fermentación, catalizados por bacterias, éstas no se encuentran a menudo aisladas sino formando agregados o flóculos, ya sean de una misma especie o multiespecíficos. Uno de los métodos de mantener los microorganismos en el reactor y evitar que sean arrastrados, por el fluido portador de nutrientes, es favorecer estos agregados o su fijación a una superficie porosa. En cualquiera de estas dos situaciones pueden conseguirse altas densidades de microorganismos, lo cual debe traducirse, a priori, en un aumento de la actividad en el reactor.

La relación actividad/densidad de microorganismos no es lineal, y depende de la configuración geométrica del agregado y de los fenómenos involucrados en el transporte de nutrientes, tanto interno como externo a él.

Considerando las hipótesis básicas siguientes,

- 1.- Situación de régimen estacionario. El crecimiento es lento y la variación temporal de la concentración de nutrientes (C_x) es aproximadamente nula [B-1],
- 2.- El transporte de nutrientes en el interior de los agregados se realiza únicamente por difusión y el coeficiente de difusión (D_x) es constante,
- 3.- La tasa específica de crecimiento (μ) de las bacterias sigue la cinética de Monod (1.949):

$$\mu = \frac{\hat{\mu} C_x}{K_s + C_x} \quad (1)$$

- 4.- La tasa de conversión del sustrato (Y) se mantiene constante,
 - 5.- La distribución de bacterias es uniforme y su densidad (X) es constante,
 - 6.- Los parámetros cinéticos $\hat{\mu}$ y K_s se mantienen constantes.
- la ecuación del transporte interno y consumo viene dada por:

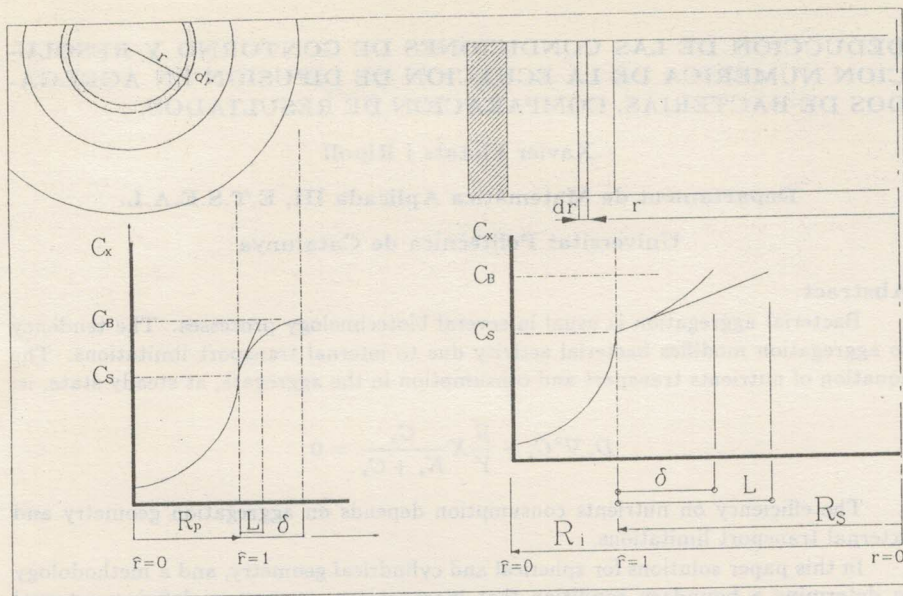


Fig.1.- Diagrama de los perfiles de C_x en agregados esféricos y biofilms fijados a soportes cilíndricos

$$D_x \nabla^2 C_x - \frac{\hat{\mu}}{Y} X \frac{C_x}{K_s + C_x} = 0 \quad (2)$$

Se define la eficiencia (η) como el cociente entre el flujo de nutrientes que entran en el agregado, y son realmente consumidos, y los que se consumirían si todas sus bacterias estuvieran sometidas a una concentración de sustrato igual a la del fluido que envuelve a la partícula (C_B).

Es de interés obtener una metodología de cálculo de la eficiencia de las células agregadas, para lo cual debe resolverse previamente (2). El flujo de nutrientes que son transportados hasta la superficie externa del agregado es un limitante de la eficiencia, de forma que deben incorporarse los parámetros que lo definen en una de las condiciones de contorno.

A continuación se estudian dos configuraciones habituales: agregados libres, aproximadamente esféricos de radio R_p , y agregados fijados a la superficie interna de soportes cilíndricos, de radio R_i (ver Fig. 1).

2.- Geometría esférica.

Utilizando coordenadas esféricas y aplicando los siguientes cambios de variable,

$$\hat{r} = \frac{r}{R_p} \quad \hat{C}_x = \frac{C_x}{C_B} \quad \alpha = \frac{K_s}{C_B} \quad \Phi = \left(\frac{\hat{\mu} X R_p^2}{Y K_s D_x} \right)^{1/2} \quad (3)$$

de (2) se obtiene:

$$\frac{2}{\hat{r}} \frac{d\hat{C}_x}{d\hat{r}} + \frac{d^2\hat{C}_x}{d\hat{r}^2} = \Phi^2 \alpha \frac{\hat{C}_x}{\alpha + \hat{C}_x}, \quad \hat{r} \in [0, 1], \quad \hat{C}_x \in [0, 1] \quad (4)$$

con una primera condición de contorno: $\frac{d\hat{C}_x}{d\hat{r}} = 0, \quad \hat{r} = 0$ (5)

Son usuales dos planteamientos para la obtención de la segunda condición de contorno para (4): a) En caso de no considerar limitaciones de transporte externo, la concentración de nutrientes en la superficie del agregado se iguala a la del fluido: $\hat{C}_x = 1, \quad \hat{r} = 1$; b) Suponiendo limitaciones de transporte externo, se considera una capa alrededor de la partícula, de anchura L , en la que los nutrientes son transportados por difusión y se aplica la simplificación de que la variación de C_x es lineal [J-1]. El flujo total de nutrientes debe ser el mismo para cualquier $r \in [R_p, R_p + L]$. Si J_x y J_L son las densidades de flujo en $r = R_p$ y en $r = R_p + L$ respectivamente,

$$D_t \frac{C_B - C_S}{L} \approx J_L = \left(\frac{R_p}{R_p + L} \right)^2 J_x = \left(\frac{R_p}{R_p + L} \right)^2 D_x \left(\frac{dC_x}{dr} \right)_{r=R_p} \quad (6)$$

siendo D_t el coeficiente de difusión en el fluido. Aplicando los cambios de variable definidos en (3), con $\hat{L} = L/R_p$, se obtiene la condición de contorno siguiente:

$$\hat{C}_x + \left(\frac{1}{1 + \hat{L}} \right)^2 \hat{L} \left(\frac{D_x}{D_t} \right) \left(\frac{d\hat{C}_x}{d\hat{r}} \right) = 1, \quad \hat{r} = 1 \quad (7)$$

Si la partícula se encuentra suspendida, en reposo, en un medio infinito y en estado estacionario, la anchura de la capa L , en la que el transporte es por difusión, debe ser infinitamente grande. Pasando al límite ($\hat{L} \rightarrow \infty$), de (7) se obtiene la segunda condición para una situación de no limitaciones de transporte externo, en clara contradicción con la situación actual de transporte por difusión. La simplificación de considerar variación lineal de C_x en un entorno de la partícula puede aportar errores en la evaluación de la eficiencia, por lo cual debe considerarse un tercer planteamiento.

Considerando la presencia de una capa o subcapa límite laminar, δ , alrededor de la partícula, en la que el transporte es por difusión, y sin consideraciones previas de variación lineal de C_x , el flujo de nutrientes evaluado en cualquier punto $r_1, r_2 \in [R_p, R_p + \delta]$ es el mismo,

$$\left(\frac{dC_x}{dr} \right)_{r=r_1} r_1^2 = \left(\frac{dC_x}{dr} \right)_{r=r_2} r_2^2 \quad (8)$$

e igual al flujo a derecha o izquierda en $r = R_p$,

$$D_x \left(\frac{dC_x}{dr} \right)_{r=R_p^-} R_p^2 = D_t \left(\frac{dC_x}{dr} \right)_{r=R_p^+} R_p^2 \quad (9)$$

de forma que $\forall r > R_p, r \in [R_p, R_p + \delta], r = R_p + x$:

$$\left(\frac{dC_x}{dr} \right)_{r=R_p+x} = \frac{D_x}{D_t} \left(\frac{R_p}{R_p+x} \right)^2 \left(\frac{dC_x}{dr} \right)_{r=R_p^-} \quad (10)$$

Con los cambios de variable definidos en (3) y $\hat{x} = x/R_p$, $\hat{\delta} = \delta/R_p$:

$$\left(\frac{d\hat{C}_x}{d\hat{r}} \right)_{\hat{r}=1+\hat{x}} = \frac{D_x}{D_t} \left(\frac{1}{1+\hat{x}} \right)^2 \left(\frac{d\hat{C}_x}{d\hat{r}} \right)_{\hat{r}=1} \quad (11)$$

Integrando entre $\hat{r} = 1$ y $\hat{r} = 1 + \hat{\delta}$ ($\hat{x} = 0$, $\hat{x} = \hat{\delta}$), se obtiene la segunda condición de contorno para (4):

$$1 = \hat{C}_x + \frac{D_x}{D_t} \left(\frac{\hat{\delta}}{1+\hat{\delta}} \right) \left(\frac{d\hat{C}_x}{d\hat{r}} \right), \quad \hat{r} = 1 \quad (12)$$

Para una partícula suspendida en un medio infinito ($\hat{\delta} \rightarrow \infty$):

$$1 = \hat{C}_x + \frac{D_x}{D_t} \left(\frac{d\hat{C}_x}{d\hat{r}} \right), \quad \hat{r} = 1 \quad (13)$$

En análisis dimensional, el transporte externo se estudia mediante expresiones del número de Sherwood (Sh) [B-2]. Se comprueba, para partículas esféricas, que la relación entre éste y el valor medio ponderado de δ viene dado por:

$$\frac{\hat{\delta}}{1+\hat{\delta}} = \frac{\delta}{R_p + \delta} = \frac{2}{Sh} \quad (14)$$

El mínimo valor de Sh dado por las correlaciones al uso es de 2 (partícula suspendida en un medio infinito), que coincide con el obtenido en el presente análisis.

A partir de la definición de la eficiencia, aplicando los cambio de variable definidos en (3) se obtiene la expresión para agregados esféricos:

$$\eta = \frac{3}{\Phi^2} \left(\frac{\alpha+1}{\alpha} \right) \left(\frac{d\hat{C}_x}{d\hat{r}} \right)_{\hat{r}=1} \quad (15)$$

3.- Geometría cilíndrica.

Aplicando los siguientes cambios de variable,

$$\left. \begin{aligned} \hat{r} &= \frac{R_i - r}{R_i - R_s} & \hat{C}_x &= \frac{C_x}{C_B} & \alpha &= \frac{K_s}{C_B} \\ \Phi &= \left(\frac{\hat{\mu} X (R_i - R_s)^2}{Y K_s D_x} \right)^{1/2} & L_x &= \frac{R_i - R_s}{R_i}, & L_x &\in [0, 1] \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

y utilizando coordenadas cilíndricas, de (2) se obtiene:

$$\frac{d^2 \hat{C}_x}{d\hat{r}^2} - \frac{L_x}{1 - L_x \hat{r}} \frac{d\hat{C}_x}{d\hat{r}} = \Phi^2 \alpha \frac{\hat{C}_x}{\alpha + \hat{C}_x}, \quad \hat{r} \in [0, 1], \quad \hat{C}_x \in [0, 1] \quad (17)$$

$$\text{El flujo en la superficie del soporte es nulo: } \frac{d\hat{C}_x}{d\hat{r}} = 0, \quad \hat{r} = 0 \quad (18)$$

Utilizando la misma metodología que para geometría esférica, considerando una subcapa límite laminar, de anchura media δ en la que el transporte de nutrientes es por difusión, y sin simplificación de linealidad:

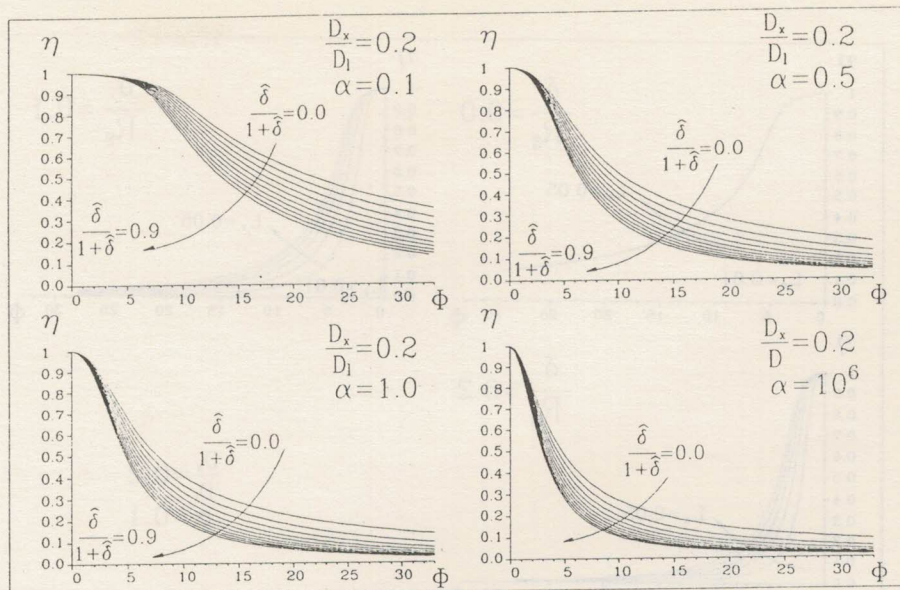


Fig.2.- Valores de η , (15), a partir de las soluciones de (4) con (5) y (12), para diversos valores de los parámetros involucrados.

$$1 = \hat{C}_x - \frac{D_x}{D_l} \left(\frac{d\hat{C}_x}{d\hat{r}} \right) \frac{1 - L_x}{L_x} \ln \left(1 - \frac{\delta}{R_s} \right), \quad \hat{r} = 1 \quad (19)$$

El cociente δ/R_s es calculable a partir de correlaciones existentes sobre flujo interno en tubos cilíndricos.

La expresión de la eficiencia para geometría cilíndrica vendrá dada por:

$$\eta = \frac{2}{\Phi^2} \left(\frac{\alpha + 1}{\alpha} \right) \left(\frac{1 - L_x}{2 - L_x} \right) \left(\frac{d\hat{C}_x}{d\hat{r}} \right)_{\hat{r}=1} \quad (20)$$

4.- Resultados numéricos.

El objetivo es el cálculo de la eficiencia (15 y 20) a partir de los parámetros geométricos, cinéticos y de transporte externo dados por D_l , Sh para partículas esféricas y δ/R_s para biofilms cilíndricos.

El método de resolución de (4) con (5) y (12), o (17) con (18) y (19), ha sido el del tiro: método de la secante, para minimizar la función definida mediante la segunda condición de contorno (12 o 19), con el método adaptativo de Runge-Kutta-Fehlberg (R-K-F) de 5° orden, con 6 evaluaciones de la función.

Para fines de cálculo y simulación es suficiente una precisión en la eficiencia de 10^{-6} , para lo cual se ha mostrado suficiente un valor de la tolerancia, en el método R-K-F, de 10^{-6} para valores de Φ inferiores a 15, y el método de la secante converge en 4 o 5 iteraciones. Conforme el parámetro Φ aumenta el proceso no converge en todos los casos si no se disminuye la tolerancia en R-K-F.

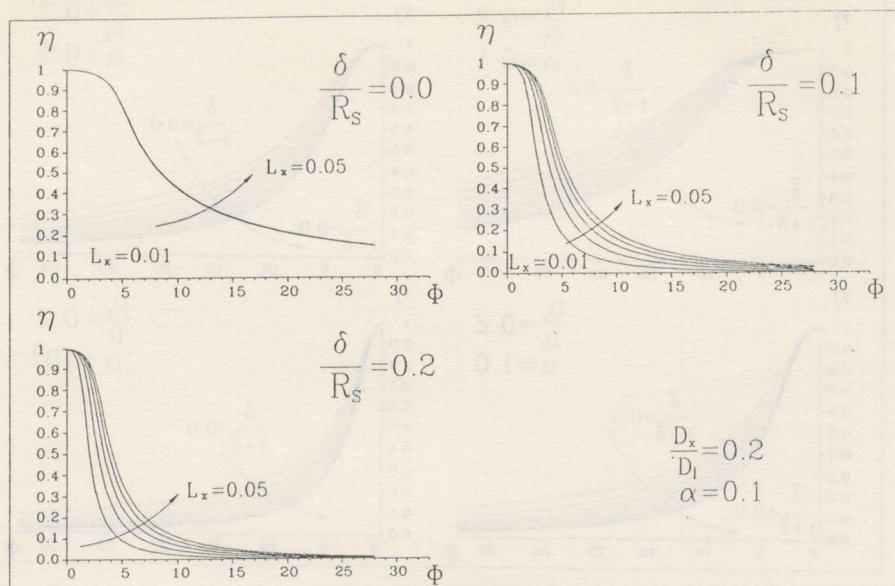


Fig.3.- Valores de η , (20), a partir de las soluciones de (17) con (18) y (19), para diversos valores de los parámetros involucrados.

A fin de asegurar la convergencia para los valores usuales de Φ (0 a 30), sin un aumento innecesario del tiempo de computación, se ha impuesto la división de la tolerancia por 10 cada 10 iteraciones en las que no se ha conseguido disminuir la función a minimizar por debajo de 10^{-8} . En las Fig. 2 y 3 se muestran los valores obtenidos de la eficiencia para diversos valores de los parámetros involucrados.

5.- Conclusiones.

La metodología presentada permite el cálculo de la actividad global en reactores en los que coexistan agregados de diferentes tipos, y el estudio de ésta según el régimen hidráulico, el cual define los valores de los parámetros del transporte externo y, en definitiva, una condición de contorno.

La eficiencia de las bacterias aumenta con la disminución del tamaño de sus agregados, el aumento de la concentración de nutrientes y la turbulencia en el fluido.

6.- Referencias.

- [B-1] BENEFIELD, L., MOLZ, F. A kinetic model for the activated sludge process which considers diffusion and reaction in the microbial floc. *Biotechnology and Bioengineering*, 25, pp 2591-2615, 1.983.
- [B-2] BRAUER, H. Transport processes through the interface of particles. *Fundamentals in Biotechnology Eng.*, Vol. 2. Ed. Rehm, H-J, Reed, G. VCH, 1.985.
- [J-1] JENNINGS, P.A., SNOEYINK, V.L., CHIAN. Theoretical model for a submerged biological filters. *Biotech. and Bioengineering*, 18, pp 1249-1273, 1.976.

La comunicación presentada forma parte del trabajo "Modelización matemática de reactores tipo filtro anaeróbico", financiado por la Fundación Caixa de Barcelona.